

不安定次元が揺らぐ流体ダイナミクスに関する 機械学習モデルの構築

齊木 吉隆 (一橋大学 大学院経営管理研究科)

概要

近年、機械学習の一種で、リカーレントニューラルネットワークをもったリザーバーコンピューティングが決定論的構造を背後にもつ時系列予測などに有効であることが報告されている。我々はこの機械学習手法を用いて比較的平穏な流体のエネルギー変数のモデルを構成し、機械学習モデルによる時間発展予測などを成功させている (Nakai and Saiki, Physical Review E, 2018)。時間発展モデリングにおける機械学習の適切な活用のために、どのようなクラスの決定論的ダイナミクスが機械学習を用いてどのような観点、どのような精度でモデル化しうるかといったことを明らかにすることが期待されている。本研究では、流体乱流など間欠性を示す複雑ダイナミクスにおいて普遍的にあらわれる構造であると考えられているヘテロカオス性の再現性を明らかにした。

1 共同研究に関する情報

1.1 共同研究を実施した拠点名

- 東京大学 情報基盤センター

1.2 課題分野

- 大規模計算科学課題分野

1.3 共同研究分野 (HPCI 資源利用課題のみ)

- 超大規模数値計算系応用分野

1.4 参加研究者の役割分担

本共同研究は 4 人体制でおこなわれている。

- 研究代表者 齊木吉隆: 背後にある数学的構造の解明、リザーバーコンピューティングによる数理モデル構築
- 副代表者 中井拳吾 (岡山大学学術研究院 環境生命自然科学学域): トレーニングデータの作成、リザーバーコンピューティング

による数理モデル構築

- その他の共同研究者 小林幹 (立正大学 経済学部): 背後にある数学的構造の解明
- その他の共同研究者 武藤誠 (日本大学 経済学部 経済学科): トレーニングデータの作成

研究の各側面でスーパーコンピュータが活用されている。

2 研究の目的と意義

機械学習の利用は分類、画像認識等の静的なものに留まらず、決定論的なダイナミクスに関する時間発展モデリングなど動的な対象へも広がりがつつある。研究代表者らは、流体乱流の時系列予測を可能とする機械学習を活用した時間発展モデリングに 2018 年に世界ではじめて成功した。また、これまでに機械学習時系列モデルの力学系理論に基づく解析を実施して、各種

不変集合や不変多様体の再現性を調べ、不動点やその固有値、周期軌道などの再現性を確認した。また、力学系理論の分野で近年研究が盛んにおこなわれている非双曲力学系がもつ主要な二つの特性のうち、安定多様体と不安定多様体の接構造をもつ力学系の多様体構造、すなわち安定多様体と不安定多様体のなす角度の出現頻度分布も再現しうることを確認した。

本研究では、非双曲型力学系のもう一つの主要な特性、ヘテロ次元サイクルとよばれる不安定次元の異なる不変集合が共存する構造に起因するヘテロカオスに着目する。ヘテロカオスは不安定次元の異なる周期軌道がカオス的不変集合にそれぞれ稠密に存在しているものであり、流体乱流など間欠性を示す複雑ダイナミクスにおいて普遍的にあらわれる構造であると考えられている。本研究では、ヘテロカオス性が時系列の機械学習であるリザーバーコンピューティングによって得られたモデルにおいて再現されるかどうかを明らかにした。リザーバーコンピューティングを用いた数理モデル構築にスーパーコンピュータを利用した。

力学系理論の分野で長年研究をしてきた研究代表者らが、時間発展モデルの力学系性質に注目して学習可能性を明らかにした。本研究は、力学系理論、数理モデリング、機械学習、大規模計算にまたがる真の学際的・融合的研究であると言える。

3 当拠点公募型研究として実施した意義

リザーバーコンピューティングに基づく物理ダイナミクスの予測に関しては、アメリカのメリーランド大学のグループがこれまでリードしてきたが、リザーバーコンピューティングを用いた流体乱流の数理モデリングならびにそれを用いた予測に、我々、研究代表者と副代表者の

グループがはじめて成功した。拠点公募型共同研究として数学・経済学・大規模計算の学際的なチームを編成して多くのスーパーコンピュータ資源を用いた研究を推進することによって、リザーバーコンピューティングモデルの力学系解析においても我が国が世界をリードすることが期待される。

本研究課題では時系列データの機械学習によるモデリングを行った。時系列データの力学系構造を精度良く学習するためには、大量の時系列データを取得し大規模な計算資源を使うことが必要不可欠である。

このためには、JHPCN の枠組みを最大限に活用することによって研究目標の達成が実現できた。

4 前年度までに得られた研究成果の概要

新規課題のため該当しない。

5 今年度の研究成果の詳細

本計算資源を利用した研究では、既知の力学系 A が生み出す時系列データのみを学習し得られた機械学習時間発展モデル B を構築し、もとの力学系 A と機械学習モデル B を有限時間リアプノフ解析などの力学系構造の観点から対比する。当初の目標であった次の2つの研究が完了し論文としてまとめている。

- 研究項目 1. 高次元 Lorenz 系 [E. Lorenz and K. Emanuel, J. Atmos. Sci. 45, 399 (1998).] のヘテロカオス性の再現可能性の検証
- 研究項目 2. 流体マクロダイナミクスに関する機械学習モデルのヘテロカオス性の検証

まずはじめに本研究の要である機械学習モデ

リングの学習手法であるリザーバーコンピューティングについて言及した後、研究項目 1、2 の結果について述べる。

リザーバーコンピューティング. 力学系

$$\frac{d\phi}{dt} = \mathbf{f}(\phi)$$

に関し、変数 $\mathbf{u} = \mathbf{h}_1(\phi) \in \mathbb{R}^M$ と $\mathbf{s} = \mathbf{h}_2(\phi) \in \mathbb{R}^P$ について考える。ただし、時系列データ \mathbf{u} は \mathbf{s} の時系列を予測する時刻にデータはないとする。リザーバーベクトル $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^N$ ($N \gg M$) は次の式で支配されている。

$$\mathbf{r}(t+\Delta t) = (1-\alpha)\mathbf{r}(t) + \alpha \tanh(\mathbf{A}\mathbf{r}(t) + \mathbf{W}_{\text{in}}\mathbf{u}(t)), \quad (1)$$

ただし、 Δt は時間幅を表す。また、行列 \mathbf{A} 、 \mathbf{W}_{in} は $N \times N$ 、 $N \times M$ 行列である。パラメータ α ($0 < \alpha \leq 1$) は \mathbf{r} の力学系の非線形性を表し、式 (1) の Δt に依存して決める。リザーバーベクトルの初期値はその各成分を $(0, 1]$ の一様乱数から定めた $\mathbf{r}(-\tau)$ とする。ただし、 $\tau/\Delta t (\gg 1)$ はトランジェント時間のステップ数に相当する。

行列 \mathbf{W}_{in} の各列はただ一つのみ $[-\sigma, \sigma]$ の一様乱数から値を与え、それ以外は 0 とする。行列 \mathbf{A} は $D \times N$ 個の非零成分を持つ疎行列とする。 $D \times N$ 個の非零成分は $[-1, 1]$ の一様乱数から値を与える。さらに、行列 \mathbf{A} については最大固有値が ρ になるように行列のすべての要素を調整する。

リザーバーベクトル \mathbf{r} は

$$\hat{\mathbf{s}}(t) = \mathbf{W}_{\text{out}}\mathbf{r}(t)$$

により、得たいベクトルに変換する。これにより $L = T/\Delta t$ ステップのリザーバーベクトル $\{\mathbf{r}(l\Delta t)\}_{l=1}^L$ を得る。

$0 < t \leq T$ (学習時間と呼ぶ) での時系列 $\hat{\mathbf{s}}$ が既知の時系列 \mathbf{s} の近似になるように \mathbf{W}_{out}

を決定する。この決定がリザーバーコンピューティングの学習に相当する。これは次の二次形式が最小値をとるように \mathbf{W}_{out} を決定することに対応する。

$$\sum_{l=1}^L \|\mathbf{W}_{\text{out}}\mathbf{r}(l\Delta t) - \mathbf{s}(l\Delta t)\|^2 + \beta[\text{Tr}(\mathbf{W}_{\text{out}}\mathbf{W}_{\text{out}}^T)], \quad (2)$$

ただし \mathbf{q} に対して $\|\mathbf{q}\|^2 = \mathbf{q}^T\mathbf{q}$ とし、 $\beta(\geq 0)$ を含む項は \mathbf{W}_{out} の過剰適合を避けるために導入している。この決定が妥当であれば、 $t > T$ (予測時間と呼ぶ) での $\hat{\mathbf{s}}(t)$ は $\mathbf{s}(t)$ を再現できるはずである。二次形式 (2) を最小化する解を $\mathbf{W}_{\text{out}}^*$ とすると予測時間では

$$\hat{\mathbf{s}}(t) = \mathbf{W}_{\text{out}}^*\mathbf{r}(t), \quad (3)$$

として時系列 $\hat{\mathbf{s}}$ を得る。 $\mathbf{W}_{\text{out}}^*$ は次のように書くことができることが知られている:

$$\mathbf{W}_{\text{out}}^* = \delta\mathbf{S}\delta\mathbf{R}^T(\delta\mathbf{R}\delta\mathbf{R}^T + \beta\mathbf{I})^{-1}, \quad (4)$$

ただし、

$$\bar{\mathbf{r}} = \sum_{l=1}^L \mathbf{r}(l\Delta t)/L, \quad \bar{\mathbf{s}} = \sum_{l=1}^L \mathbf{s}(l\Delta t)/L$$

とし、 \mathbf{I} は $N \times N$ の単位行列、 $\delta\mathbf{R}$ 、 $\delta\mathbf{S}$ はそれぞれ l 行が $\mathbf{r}(l\Delta t) - \bar{\mathbf{r}}$ 、 $\mathbf{s}(l\Delta t) - \bar{\mathbf{s}}$ となるような行列とする。

また、予測時間 $t > T$ での時系列データ \mathbf{u} は利用できないため、 $\mathbf{u}(t)$ として式 (1) で得た $\hat{\mathbf{s}}(t)$ を用いる:

$$\mathbf{r}(t+\Delta t) = (1-\alpha)\mathbf{r}(t) + \alpha \tanh(\mathbf{A}\mathbf{r}(t) + \mathbf{W}_{\text{in}}\hat{\mathbf{s}}(t)).$$

学習に用いる変数 $X(t)$ のそれぞれの成分を対等に扱うために正規化した $\tilde{X}(t)$ を用いる: $\tilde{X}(t) = [X(t) - X_1]/X_2$. ただし、 X_1 は平均値、 X_2 は標準偏差を表す。予測時間の時系列データ $X(t)$ を $\tilde{X}(t)$ から再現するときは、学習時間の正規化に用いた X_1 と X_2 を用い

る。この正規化より σ の調整を避けることができる。

このリザーバーコンピューティングの計算に計算資源の大半を利用している。特に (4) がメインの計算であり、当然計算上は逆行列は避けつつ、この行列-行列積を効率よく計算している。

5.1 研究項目 1: 高次元 Lorenz 系のヘテロカオス性の再現可能性の検証

気象分野においてしばしば用いられている高次元ローレンツ系の機械学習モデルを解析する。機械学習は大自由度複雑現象の時間発展モデリングにしばしば用いられているリザーバーコンピューティングを用いる。ヘテロカオス性の検証には、リザーバー状態ベクトルの空間でのリアプノフ解析を実施する。

高次元ローレンツ系は次のように記述される：

$$\frac{dx_k}{dt} = x_{k-1}(x_{k+1} - x_{k-2}) - x_k + f, \quad \text{for } k = 1, \dots, K, \quad (5)$$

ただし、 $x_{-1} = x_{K-1}$ 、 $x_0 = x_K$ 、および $x_1 = x_{K+1}$ であり、 f は外力パラメータとする。高次元ローレンツ系の時系列データがリザーバーコンピューティングを用いて予測されることがすでに報告されている。

本研究ではリアプノフ解析のために高次元ローレンツ系 (5) の $(K, f) = (8, 6)$ の場合に対してリザーバーコンピューティングを用いて機械学習モデルを構成する。入力変数として $\mathbf{u}(t) = (x_1(t), \dots, x_8(t), x_1(t - \Delta\tau), \dots, x_8(t - \Delta\tau), x_1(t - 2\Delta\tau), \dots, x_8(t - 2\Delta\tau))$ を使用する。ここで $\Delta\tau$ は遅れ時間である。遅れ時間座標を導入することは、実際により良いモデルを構築する上で重要な役割を果たす。この機械学習モデルは短時間予測や統計量を再現する。2つの異なる初期条件からの短

時間予測結果については、図 1 に図示した。どちらも正解の高次元ローレンツ系の時系列とよく一致することが確認された。

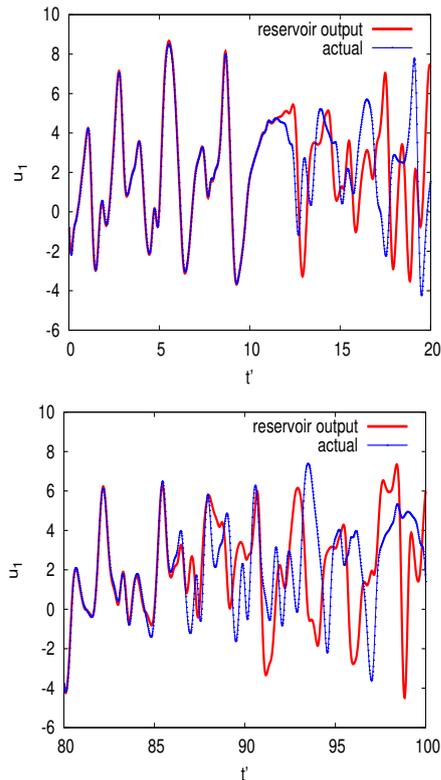


図 1 高次元 Lorenz 系の時系列データを学習して得られた機械学習モデルを用いた時系列予測。機械学習モデルから予測した x_1 変数の時系列 (赤線) と、高次元ローレンツ系の時系列 (青線) とを比較した。2つの図は、ある1つの機械学習モデルを用いて異なる初期点からの予測を行った。どちらの予測もモデルの軌道はある期間までは正解の軌道と類似した挙動を示していることがわかる。

リアプノフ指数は不安定性の度合いを評価する指標であり、これを用いて力学系のリアプノフ次元を推定する。既にリザーバー状態ベクトルのリアプノフ指数は計算されており、偏微分方程式の場合にはそれが元のシステムのリアプノフ指数とほぼ一致することが報告されてい

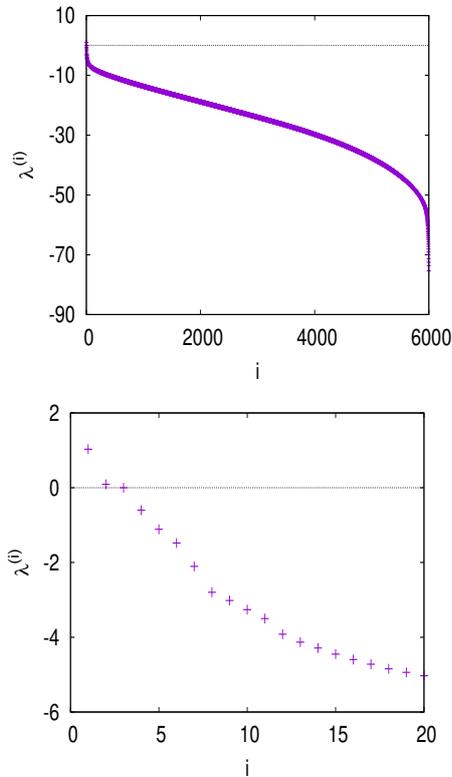


図2 高次元 Lorenz 系を学習して得た機械学習モデルのリアプノフスペクトル. 上の図は全体のリアプノフスペクトルを示しており、下の図は上位 20 個のリアプノフ指数のスペクトルを示しています。

るが、低次元ローレンツシステムの場合には正とゼロの指数のみが一致することがわかっている。図 2 はデータ駆動モデルのリアプノフスペクトルを示している。上位のいくつかのリアプノフ指数がダイナミクスの再構築において重要な役割を果たすと考えられている。

図 3 は、実際の高次元 Lorenz 系とリザーバーモデルにおける第 1 および第 2 有限時間リアプノフ指数の密度分布を示している。有限時間は 5 として計算しており、軌道方向に対応するゼロのリアプノフ指数は除外している。不安定次元が時間によって揺らぐ様子が再現されて

いることが示唆されており、この正のリアプノフ指数の数の変動は、高次元 Lorenz 系ダイナミクスに対するデータ駆動モデルにおいてヘテロカオスの存在を示唆している。

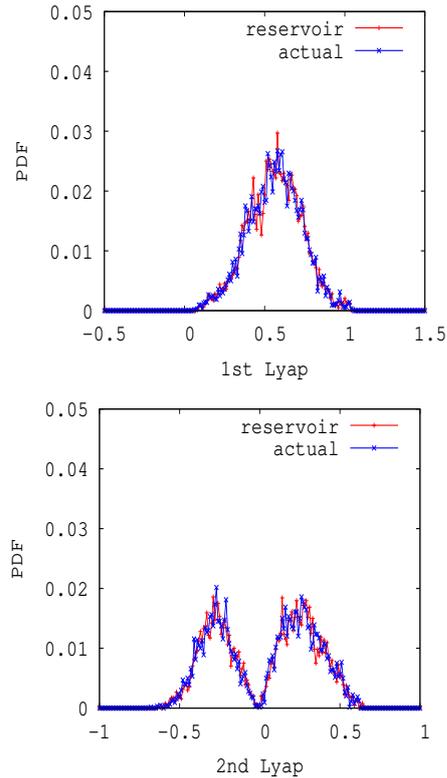


図3 第一有限時間リアプノフ指数と第二有限時間リアプノフ指数の密度分布. 高次元 Lorenz 系の時系列データを学習して得られた機械学習モデルの有限時間リアプノフ指数を計算しその密度分布を描いた。第一リアプノフ指数は常に正の値をとるが、第二リアプノフ指数は正と負の値の両方とりうるが見て取れる。

5.2 研究項目 2：流体マクロダイナミクスに関する機械学習モデルのヘテロカオス性の検証

流体運動においてそのマクロ変数の時間発展を記述するリザーバーコンピューティングモデルを構築し、それがヘテロカオス性をもつことを確認する。

本章では、カオス的な流体運動を示す観測時系列からデータ駆動モデルを構築し、モデルのリアプノフ解析を行った。このモデルは、流体マクロ変数としてある波数空間のエネルギーに焦点を当てた。この変数の観測時系列を作成するために、周期境界条件下での非圧縮三次元ナビエストークス方程式の直接数値シミュレーションを行った。

$$\begin{cases} \partial_t v - \nu \Delta v + (v \cdot \nabla)v + \nabla \pi = f, & \nabla \cdot v = 0, \\ & \text{in } \mathbb{T}^3 \times (0, \infty), \\ v|_{t=0} = v_0 \quad \text{with } \nabla \cdot v_0 = 0, & \text{in } \mathbb{T}^3, \end{cases}$$

ここで、 $\mathbb{T}^3 = \mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z}$ 、 $\nu > 0$ は粘性パラメータ、 $\pi(x, t)$ は圧力、 $v(x, t)$ は速度である。本研究では $\nu = 0.058$ とした。ODE 近似をするためにフーリエスペクトル法を各方向に 9 モード使用し、各タイムステップで 4 次のルンゲ・クッタ法を用いて積分を行った。外力 f は各時間ステップで全エネルギーをおおむね保持するように低周波数変数に入力している。波数 $k \in \mathbb{N}$ に対するエネルギー関数 $E_0(k, t)$ は次のように定義される：

$$E_0(k, t) := \frac{1}{2} \int_{D_k} \left| \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{T}^3} v(x, t) e^{-i(K \cdot x)} dx \right|^2 dK,$$

ここで $D_k := \{K \in \mathbb{R}^3 \mid k - 0.5 \leq |K| < k + 0.5\}$ である。エネルギー関数の本質的なふるまいを取り出すために、バンドパスフィルターを用いて高周波および低周波の変動を除去した。フィルタされたエネルギー変数は、本研究全体でエネルギー関数 $E(k, t)$ と呼ぶ。

リザーバーコンピューティングモデル (1) を構築し、 $\mathbf{u}(t) = (E(3, t), E(3, t -$

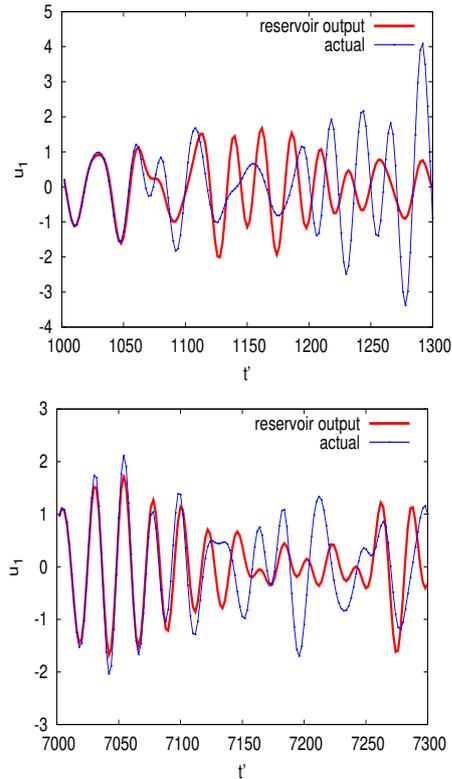


図 4 流体マクロダイナミクスの時系列データを学習して得られた機械学習モデルを用いた時系列予測。機械学習モデルから予測した流体マクロ変数の時系列 (赤線) と、高次元ローレンツ系の時系列 (青線) とを比較した。2つの図は、1つの機械学習モデルを用いて異なる初期点からの予測を行ったものである。どちらの予測もモデル軌道は一定時間本来の軌道と類似した挙動を示す。

$\Delta\tau), \dots, E(3, t - 22\Delta\tau))$ を入力変数とした。ここで $\Delta\tau$ は時間遅れ座標系の遅れ時間です。モデルは統計的特性と短時間軌道を再現している。さまざまな初期条件からのモデルの短時間軌道については図 4 に示している。いずれも実際の軌道とよく一致している。図 5 は流体のリザーバーモデルのリアプノフスペクトルを示す。正のリアプノフ指数の数は 5 である。図 6 は、リザーバーモデルがもつ不安定

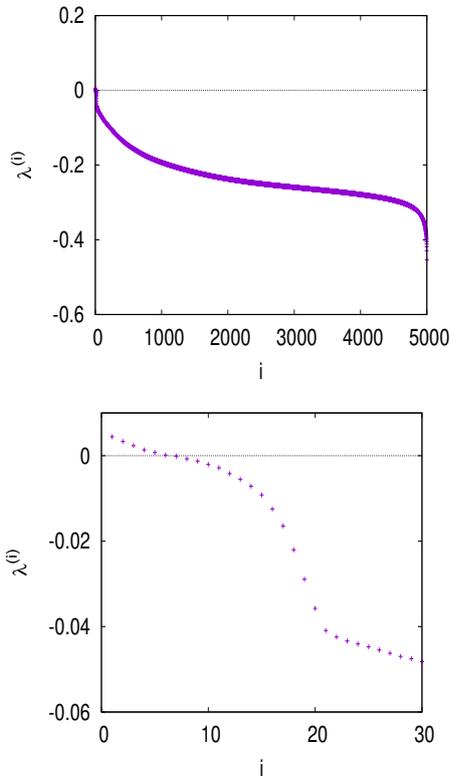


図5 流体マクロダイナミクスの機械学習モデルに対するリアプノフスペクトル。上図は全体のリアプノフスペクトルを示しており、下図は最初の30個のリアプノフ指数のスペクトルを示す。

次元の変動を示し、ひとつの振る舞いに異なる不安定次元が共存するヘテロカオス性をモデルが持っていることを示唆している。Kaplan-Yorkeの公式を用いて推定された有限時間リアプノフ次元 D_{KY} も、有限時間 $T = 20$ では $5 \leq D_{KY} \leq 13$ 、有限時間 $T = 40$ では $4 \leq D_{KY} \leq 12$ の間で変動する。

6 今年度の進捗状況と今後の展望

実施計画において次の2つの項目

1. 高次元 Lorenz 系のヘテロカオス性の再現可能性の検証

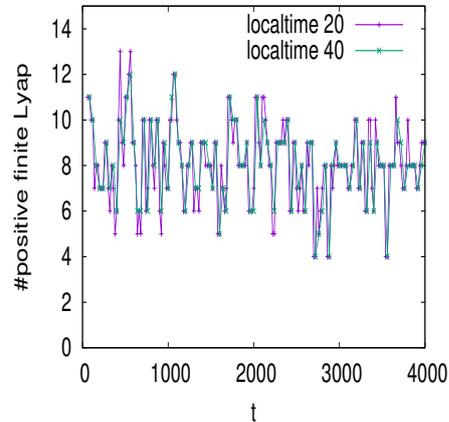


図6 リャプノフ指数と有限時間リアプノフ指数のゆらぎ。正のリアプノフ指数の数は5である。カオス的な流体運動のデータ駆動モデルにおける正の有限時間リアプノフ指数の数の時間変化を示した(ローカルタイム 20 (紫色) および 40 (緑色))。

2. 流体マクロダイナミクスに関する機械学習モデルのヘテロカオス性の検証

を予定していた。いずれも研究が完了し論文としてまとめている。

これまでの研究から高次元のニューラルネットワークを用いるリザーバーコンピューティングにおいて、実質的に有効な次元はごく一部に限られていることがわかってきた。今後の研究では実質的に有効な次元をもつ部分空間に制限したうえで力学系解析を行い、その部分空間に訓練データの力学系構造が再現されることを明らかにすることを目指す。

7 研究業績一覧（発表予定も含む）

学術論文（査読あり）

- a. Natsuki Tsutsumi, Kengo Nakai, Yoshitaka Saiki, Constructing low-dimensional ordinary differential equations from chaotic time series of high/infinite-dimensional systems using radial function-based regression, *Physical Review E* 108, 054220 (2023).

国際会議プロシーディングス（査読あり）

国際会議発表（査読なし）

1. Natsuki Tsutsumi, Kengo Nakai, Yoshitaka Saiki, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics, “Construction of differential equations from scalar chaotic time series Format” Waseda University, 2023年8月23日.
2. Kengo Nakai, Miki U. Kobayashi, Yoshitaka Saiki, Natsuki Tsutsumi, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics, “Evaluation of a data-driven model using reservoir computing from dynamical system point of view” Waseda University, 2023年8月23日.
3. Miki U. Kobayashi, Dynamics days Europe 2023, “Lyapunov analysis for a data-driven model using reservoir computing” Università degli Studi di Napoli Federico II, (Italy), 2023年9月5日.
4. Kengo Nakai, Dynamics days Europe 2023, “Constructing a data-driven model of intraseasonal weather time-series using machine learning” Università degli

Studi di Napoli Federico II, (Italy), 2023年9月6日.

5. Yoshitaka Saiki, Dynamics days Europe 2023, “Data-driven modeling of differential equations from scalar chaotic time series” Università degli Studi di Napoli Federico II, (Italy), 2023年9月6日.
6. Kengo Nakai, 20th Prediction Science Seminar, “Implementing Reservoir Computing in Practice” RIKEN, 2023年11月24日.
7. Kengo Nakai, Tateyama Dynamics Workshop 2024, “Construction of a data-driven model by periodic orbits” Tateyama, 2024年3月10日.

国内会議発表（査読なし）

1. 中井拳吾, 岡山大学 AI 研究会, “機械学習による時系列データの学習と気象現象のモデリングへの応用” 岡山大学, 2023年9月13日.
2. 中井拳吾, 数値解析と機械学習の協同が拓く新時代の数理科学, “機械学習モデルの力学系解析” 九州大学, 2023年11月2日.

公開したライブラリ等

その他（特許, プレス発表, 著書等）